

## СЕКЦИЯ 2. ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ И ЯВЛЕНИЯ В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ЭКСТРИМАЛЬНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

### МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ МАТЕРИАЛА ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СХЕМЫ НАГРУЖЕНИЯ

**Баимова Ю.А.**

*д. ф.-м. н., проф. Назаров А.А.*

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа

e-mail: julia.a.baimova@gmail.com

В задачах получения объемных наноструктурных материалов деформационными методами [4-8] особое значение приобретают исследования динамики ГЗ в условиях активной пластической деформации. Метод молекулярной динамики (МД) позволяет на атомном уровне моделировать зеренную структуру металлов. Хотя метод МД позволяет моделировать только небольшие системы, его применение дает возможность качественно оценить процессы, происходящие при пластической деформации.

В настоящее время активно развиваются деформационные методы получения объемных нанокристаллических материалов [4-8]. Однако, получить однородную структуру с субмикронным размером зерен оказывается совсем не просто из-за того, что при любом известном методе деформации, как правило, в материале остаются крупные зерна, чаще всего вытянутые в направлении сдвиговой деформации [15, 16]. Более однородная структура получается при комбинировании схем деформирования, например, выполнение прокатки после равноканального углового прессования. Таким образом, возникает вопрос о том, как схема нагружения материала влияет на эволюцию структуры границ зерен, содержащую зерна, вытянутые в одном направлении.

В данной работе было проведено молекулярно-динамическое моделирование динамики ГЗ при пластической деформации двумерного поликристалла. Было рассмотрено влияние ориентации плоскости действия максимального касательного напряжения по отношению к ориентации вытянутого зерна, окруженного равноосными зернами.

#### Описание модели

Рассматривался двумерный гексагональный кристалл, примитивная ячейка которого опирается на векторы трансляции  $\mathbf{w}_1 = (a, 0)$ ,  $\mathbf{w}_2 = (a/2, a\sqrt{3}/2)$ , где  $a$  – параметр решетки.

В задачи данного исследования не входило рассмотрение какого-либо конкретного материала, поэтому нами был выбран следующий межатомный потенциал:

$$\varphi = \begin{cases} \frac{(r-r_c)^8}{(r_b-r_c)^8} - \frac{(r-r_c)^4}{(r_b-r_c)^4}, & 0 < r < r_c, \\ 0, & r > r_c \end{cases}, \quad (1)$$

где  $r_b$  – положение минимума потенциала  $r_c$  – радиус обрезки потенциала. Назначая  $r_b=1$ , мы выбираем в качестве единицы измерения длины координату минимума потенциала. Мы полагаем  $r_c=1.336$ , таким образом, каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями, и равновесный параметр решетки при нулевой температуре равен  $a=1$ .

Расчетная ячейка, имеющая форму правильного ромба, с наложенными периодическими граничными условиями, включала  $512 \times 512$  атомов.

Объем ячейки был разбит на  $6 \times 6 = 36$  областей равного размера, каждая из которых характеризовалась определенной ориентацией кристаллической решетки. На рис.1 приведена рассматриваемая структура, где ячейка периодичности содержит 28 равноосных, 6 двойных и одно вытянутое зерно. Ориентация зерен показана оттенками серого цвета.

Исходная структура была подвергнута отжигу при гомологической температуре  $T = 0.87T_{nl}$ . Полученная равновесная конфигурация подвергалась затем действию внешнего напряжения с заданным гидростатическим давлением  $p$ , максимальным касательным напряжением  $\tau_{max}$  и углом  $\theta$ , задающим ориентацию главных напряжений  $\sigma_1, \sigma_2$  (см. рис.2).

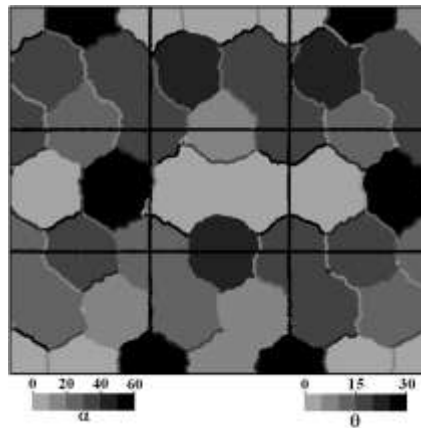


Рис.1. Исходная структура. Левая шкала показывает угол ориентации зерен  $\alpha$ , правая – угол разориентации зерен  $\theta$ .

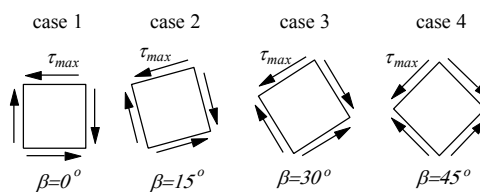


Рис.2. Ориентация максимальных касательных напряжений для четырех рассмотренных случаев нагружения поликристалла.

### Результаты моделирования

При действии сдвигающих напряжений вдоль и поперек вытянутых зерен деформация сдвига осуществляется только вдоль, но не поперек зерен. При этом вытянутое зерно еще более удлиняется, а окружающие его равноосные зерна растут. При приложении максимальных сдвигающих напряжений под углами  $\pm 45^\circ$  по отношению к оси вытянутого зерна, сдвиговая деформация идет вдоль обоих этих направлений. Конкуренция двух систем сдвига приводит к дроблению вытянутых зерен и к подавлению роста равноосных зерен. В случаях  $\beta = 15^\circ$  и  $\beta = 30^\circ$  наблюдается промежуточная картина. В первом случае происходит заметный рост зерен, а во втором – рост блокируется наличием дополнительных систем скольжения. Структуры, полученные при интенсивности деформации  $\varepsilon_i = 1$  показаны на рис.3.

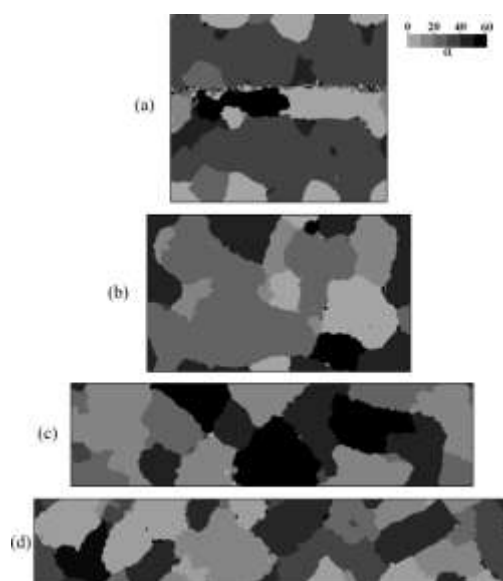


Рис. 3. Микроструктура, полученная при интенсивности напряжения  $\varepsilon_i = 1$  для четырех случаев нагружения а)  $\beta = 0^\circ$  б)  $\beta = 15^\circ$  в)  $\beta = 30^\circ$  г)  $\beta = 45^\circ$ .

### Список литературы

1. Humphreys F.J., Prangnell P.B., Bowen J.R., Gholinia A., Harris C. // Philos Trans. R. Soc. Lond. V. A357. 1999. P. 1663-1681.
2. Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. // Progr. Mater. Sci. V. 45. 2000. P. 103-189.
3. Valiev R.Z., Langdon T.G. // Progr. Mat. Sci. V.51. 2006. P. 881-981.
4. Nazarov A.A., Mulyukov R.R. Nanostructured Materials. In: Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology, Ed. Goddard W., Brenner D., Lyshevski S., Iafrate G., CRC Press, 2003. Chapter 22. P. 1-41.
5. Мулюков Р.Р. // Российские нанотехнологии т.2. 2007. С. 38-53.
6. Apps P.J., Berta M., Pragnell P.B. // Acta Materialia V.53. 2005. P. 499-511.
7. Mazurina I., Sakai T., Miura H., Sitdikov O., Kaibyshev R. // Mat. Sci. Eng. A V.486. 2008. P. 662-671.